



TITLE:

ナノ炭素材料の理論的研究

AUTHOR(S):

小島, 崇寛

CITATION:

小島, 崇寛. ナノ炭素材料の理論的研究. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 37-37

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241164>

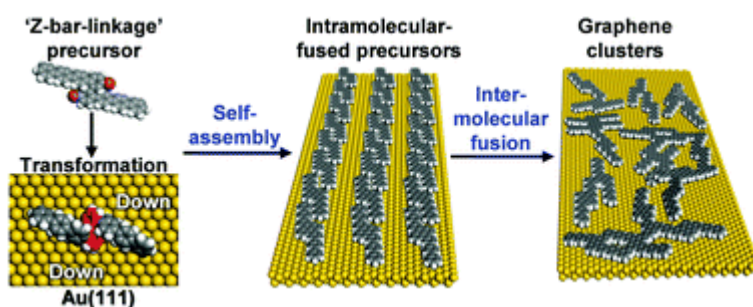
RIGHT:

ナノ炭素材料の理論的研究
Theoretical study of nanocarbon materials

京都大学 エネルギー理工学研究所 エネルギー利用過程研究部門
分子ナノ工学研究分野 小島崇寛

ナノ炭素細線物質であるグラフェンナノリボン(GNR)は、分子幅・炭素骨格に依存した物性を有し、優れた電子・磁気特性を示す次世代型の高機能材料として期待されている。極細分子幅・エッジ構造を制御して GNR を作り分ける合成法として、我々は 2 ゾーン気相成長法(2Z-CVD 法)を開発した。2Z-CVD 法により GNR を高効率合成することでボトムアップ型 GNR 薄膜の単離が可能となり、実験的な物性計測に成功している。

また、我々は新規に開発した Z 型前駆体分子を用いることでアセン型 GNR の表面合成に成功している。[1] 高選択的に進行した Z 型分子の表面重合反応のメカニズムについて、表面分子種の構造を計算機シミュレーションにより考察を行うと、面不斉が発現する表面キラリティーに加え、反応活性なラジカル中心の存在する Z 型の蝶つがいの 2 つのベンゼン環に高さ方向の非対称を有する構造が最安定構造として得られた。高さ非対称性の発現により、“鍵と鍵穴”構造を自発的に形成し同種のみ選択的する自己組織化表面重合の機構を明らかにした。さらに Z 型分子の枝長を伸ばした分子を設計し CVD を行うと、GNR は得られず、Z 型分子のアレイが観測された。この理由を明らかにするため、計算を行った結果、Z 型分子の Au(111)上の吸着構造が異なることが明らかとなり、この吸着構造の違いが反応経路の違いとなったことを明らかにした。[2]



Ref.

- [1] Homochiral polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons,
H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *ACS Nano*, **2017**, *11*, 57-63.

発表論文(謝辞あり)

- [2] Z. Xu, T. Kojima, W. Wang, K. Kaushik, A. Saliniemi, T. Nakae, H. Sakaguchi, *ACS Nano*, **2018**, *2*, 775.